

# 1,3,5-TRIS(4-(N-CARBAZOLYL)PHENYL)BENZENE DERIVATIVE

**Publication number:** JP6312979 (A)

**Publication date:** 1994-11-08

**Inventor(s):** SHIROTA YASUHIKO; INADA HIROSHI +

**Applicant(s):** BANDO CHEMICAL IND +

**Classification:**

- international: C07D209/86; C09K11/00; C09K3/00; C09K9/00; C07D209/00;  
C09K11/00; C09K3/00; C09K9/00; (IPC1-7): C07D209/86;  
C09K11/00; C09K3/00; C09K9/00

- European:

**Application number:** JP19930104532 19930430

**Priority number(s):** JP19930104532 19930430

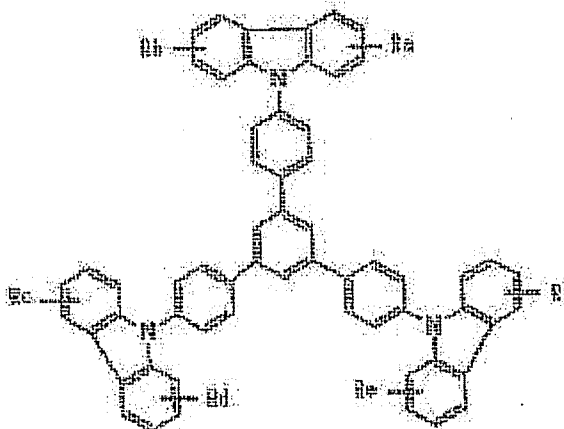
**Also published as:**

JP3210481 (B2)

## Abstract of JP 6312979 (A)

**PURPOSE:** To obtain a new compound, capable of keeping an amorphous state at ordinary temperature, readily formable into a thin film, excellent in heat resistance and stability and useful as a photoelectric converting element, etc.

**CONSTITUTION:** The compound is expressed by the formula [Ra to Rf are H, alkyl, aryl or aralkyl; (a) to (f) are 1-41, e.g. 1,3,5-tris[4-(N-carbazolyl) phenyl] benzene. Furthermore, this compound expressed by the formula is obtained by subjecting, e.g. 1,3,5-tris (4-iodophenyl)benzene and a carbazole derivative to the Ullmann reaction.



Data supplied from the **espacenet** database — Worldwide

**Family list**

**1** application(s) for: JP6312979 (A)

**1 1,3,5-TRIS(4-(N-CARBAZOLYL)PHENYL)BENZENE  
DERIVATIVE**

**Inventor:** SHIROTA YASUHIKO ; INADA  
HIROSHI

**Applicant:** BANDO CHEMICAL IND

**EC:**

**IPC:** C07D209/86; C09K11/00; C09K3/00; (+9)

**Publication** JP6312979 (A) - 1994-11-08

**Priority Date:** 1993-04-30

**info:** JP3210481 (B2) - 2001-09-17

---

Data supplied from the **espacenet** database — Worldwide

(19)日本国特許庁 (J P)

(12) 公 開 特 許 公 報 (A)

(11)特許出願公開番号

特開平6-312979

(43)公開日 平成6年(1994)11月8日

(51)Int.Cl.<sup>5</sup>

C 0 7 D 209/86

// C 0 9 K 3/00

9/00

11/00

識別記号

庁内整理番号

9284-4C

A 9155-4H

C 9155-4H

E 7188-4H

F 9159-4H

F I

技術表示箇所

審査請求 未請求 請求項の数 2 O L (全 5 頁)

(21)出願番号

特願平5-104532

(22)出願日

平成5年(1993)4月30日

(71)出願人 000005061

バンドー化学株式会社

兵庫県神戸市兵庫区明和通3丁目2番15号

(72)発明者 城田 靖彦

大阪府豊中市大黒町3-5-7

(72)発明者 稲田 宏

京都府長岡京市今里細塚16-10

(74)代理人 弁理士 牧野 逸郎

(54)【発明の名称】 1, 3, 5-トリス〔4-(N-カルバゾリル)フェニル〕ベンゼン誘導体

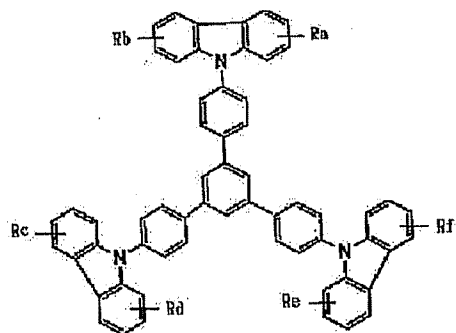
(57)【要約】

【目的】常温でアモルファス状態を保持することができ、170℃以上のガラス転移点を有し、かくして、それ自体で薄膜化することができ、しかも、そのアモルファス膜が常温で極めて安定であつて、光電変換素子、サーモクロミツク素子、光メモリー素子、エレクトロルミネツセンス素子における正孔輸送層のための有機化合物等として有用な新規化合物を提供するにある。

【構成】本発明による化合物は、一般式

【化1】

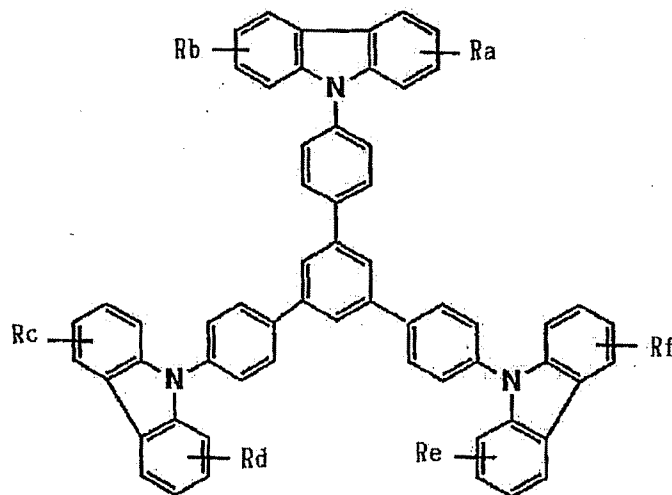
(式中、Ra (aは1~4の整数を示す。)、Rb (bは1~4の整数を示す。)、Rc (cは1~4の整数を示す。)、Rd (dは1~4の整数を示す。)、Re (eは1~4の整数を示す。))及びRf (fは1~4の整数を示す。))は、それぞれ独立に水素、アルキル基、アリール基又はアラルキル基を示す。)で表わされる1, 3, 5-トリス〔4-(N-カルバゾリル)フェニル〕ベンゼン誘導体であり、特に好ましくは1, 3, 5-トリス〔4-(N-カルバゾリル)フェニル〕ベンゼンである。



【特許請求の範囲】

【請求項1】 一般式 (I)

【化1】



(式中、Ra (aは1～4の整数を示す。)、Rb (bは1～4の整数を示す。)、Rc (cは1～4の整数を示す。)、Rd (dは1～4の整数を示す。)、Re (eは1～4の整数を示す。))及びRf (fは1～4の整数を示す。))は、それぞれ独立に水素、アルキル基、アリール基又はアラルキル基を示す。)で表わされる1,3,5-トリス〔4-(N-カルバゾリル)フェニル〕ベンゼン誘導体。

【請求項2】 1,3,5-トリス〔4-(N-カルバゾリル)フェニル〕ベンゼン。

【発明の詳細な説明】

【0001】

【産業上の利用分野】本発明は、常温でアモルファス状態を保持することができ、かくして、それ自体で薄膜化することができ、光電変換素子、サーモクロミツク素子、光メモリー素子等として有用であり、また、エレクトロルミネツセンス素子における正孔輸送層を形成するための有機化合物として有用な新規化合物である1,3,5-トリス〔4-(N-カルバゾリル)フェニル〕ベンゼン誘導体に関する。

【0002】

【従来の技術】従来、光を照射することによって導電性や電荷生成等を生じる所謂光・電子機能を有する低分子量有機化合物は、それ自体では、薄膜形成能をもたないので、薄膜を形成するためには、バインダー樹脂に分散させて(従つて、希釈した状態で)、基材上に塗布し、薄膜化することが必要である。

【0003】

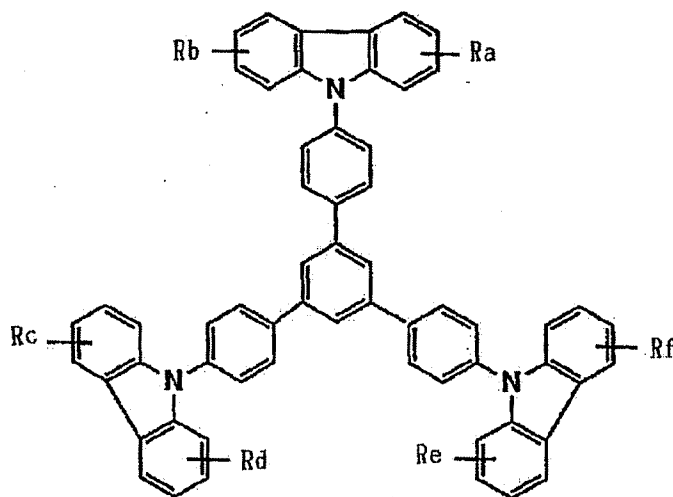
【発明が解決しようとする課題】本発明は、かかる従来の光・電子機能を有する低分子量有機化合物と異なり、常温でアモルファス状態、即ち、ガラス状態を保持することができ、従つて、バインダー樹脂を用いることなく、真空蒸着法によつてそれ自体で大面積に薄膜化することができる新規な光・電子機能を有する低分子量有機化合物を提供することを目的とする。

【0004】

【課題を解決するための手段】本発明によつて、一般式 (I)

【0005】

【化2】



【0006】(式中、Ra (aは1～4の整数を示す。)、Rb (bは1～4の整数を示す。)、Rc (cは1～4の整数を示す。)、Rd (dは1～4の整数を示す。)、Re (eは1～4の整数を示す。))及びRf (fは1～4の整数を示す。))は、それぞれ独立に水素、アルキル基、アリール基又はアラルキル基を示す。)で表わされる1,3,5-トリス〔4- (N-カルバゾリル) フェニル〕ベンゼン誘導体が提供される。

【0007】本発明において、上記Ra (aは1～4の整数を示す。)、Rb (bは1～4の整数を示す。)、Rc (cは1～4の整数を示す。)、Rd (dは1～4の整数を示す。)、Re (eは1～4の整数を示す。))及びRf (fは1～4の整数を示す。))は、それぞれ独立に水素、アルキル基、アリール基又はアラルキル基を示し、アルキル基の場合は、好ましくは、メチル基、エチル基、プロピル基、ブチル基等の低級アルキル基、アリール基の場合は好ましくはフェニル基を、また、アラルキル基の場合は、好ましくはベンジル基等を示す。特に、本発明においては、Ra、Rb、Rc、Rd、Re及びRfは、好ましくはすべてが水素である。

【0008】従つて、本発明によれば、好ましい態様として、1,3,5-トリス〔4- (N-カルバゾリル) フェニル〕ベンゼンが提供される。本発明による1,3,5-トリス〔4- (N-カルバゾリル) フェニル〕ベンゼン誘導体は、一般に、1,3,5-トリス〔4-ヨードフェニル〕ベンゼンとカルバゾール誘導体とのウルマン反応によつて得ることができる。即ち、1,3,5-トリス〔4-ヨードフェニル〕ベンゼンとカルバゾール誘導体とを塩基及び銅粉の存在下に溶剤中で加熱反応させればよい。

【0009】塩基としては、水酸化カリウム、水酸化ナトリウム等のアルカリ金属水酸化物が好ましく用いられ、また、溶剤としては、炭化水素、例えば、デカリンが好ましく用いられるが、これに限定されるものではない。反応終了後、得られた反応混合物を室温まで冷却し、熱溶剤 (好ましくは熱芳香族炭化水素) にて抽出

し、これをシリカゲルクロマトグラフィーと再結晶法にて精製すれば、目的とする1,3,5-トリス〔4- (N-カルバゾリル) フェニル〕ベンゼン誘導体を得ることができる。

【0010】本発明による化合物が非晶質で異方性をもたないアモルファス状態にあることは、例えば、ガラス転移温度を有することや、粉末X線回折において明確なピークを示さないこと等によつて立証される。

#### 【0011】

【発明の効果】本発明によつて、新規化合物である1,3,5-トリス〔4- (N-カルバゾリル) フェニル〕ベンゼン誘導体、特に、1,3,5-トリス〔4- (N-カルバゾリル) フェニル〕ベンゼンが提供される。この化合物は、真空蒸着法等の適宜の手段によつて、常温で安定なアモルファス膜に形成することができ、それ自体で大面積に薄膜化させることができる。しかも、本発明による化合物は、構造が剛直であつて、ガラス転移点が170℃以上であるので、そのアモルファス膜は、耐熱性にすぐれており、室温で極めて安定であつて、結晶化しない。

【0012】本発明による化合物は、このように、常温でそれ自体で薄膜化することができ、光電変換素子、サーモクロミツク素子、光メモリー素子等として有用であり、また、エレクトロルミネツセンス素子における正孔輸送層を形成するための有機化合物等としても有用である。

#### 【0013】

##### 【実施例】

(1,3,5-トリス〔4- (N-カルバゾリル) フェニル〕ベンゼンの合成) 1,3,5-トリス〔4-ヨードフェニル〕ベンゼン2.0g、カルバゾール2.9g、水酸化カリウム2.9g及び銅粉1.5gをデカリン5mlと共に四つ口フラスコに入れ、窒素雰囲気下、180℃で15時間反応させた。

【0014】反応終了後、得られた反応混合物を室温ま

で冷却し、熱トルエンにて抽出した。この抽出液をシリカゲルクロマトグラフィーと再結晶法にて精製して、1, 3, 5-トリス〔4-(N-カルバゾリル)フェニル〕ベンゼン220mg(収率9.4%)を得た。

【0015】

元素分析 (%)

	H	C	N
計算値	4.90	89.86	5.24
実験値	4.92	89.68	5.20

質量分析

M/Z=801

赤外線吸収スペクトル

図1に示す。

示差走査熱量測定 (DSC)

本発明による1, 3, 5-トリス〔4-(N-カルバゾリル)フェニル〕ベンゼンを融解させた後、冷却して固体

としたもののDSCサーモグラムを図2に示す。この化合物は、ガラス状態の試料を昇温していくと、172℃でガラス転移を示し、215℃で結晶化を生じ、その後、313℃で結晶転移をした後、346℃で融解する。

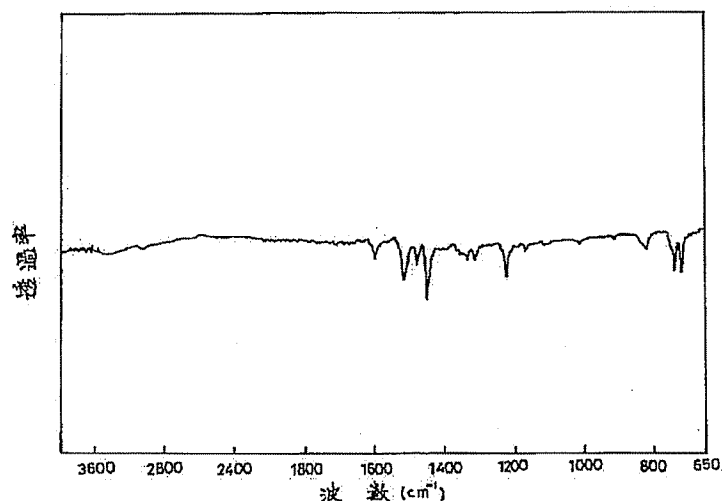
【0016】この化合物は、ガラス転移点が約172℃であつて、非常に高いので、そのアモルファス膜は、室温で極めて安定であつて、室温では、結晶化しない。

【図面の簡単な説明】

【図1】は、1, 3, 5-トリス〔4-(N-カルバゾリル)フェニル〕ベンゼンの赤外線吸収スペクトルを示す。

【図2】は、1, 3, 5-トリス〔4-(N-カルバゾリル)フェニル〕ベンゼンのDSCサーモグラムを示す。

【図1】



【图 2】

